

Ising 2D

Felipe Gonzalez

*Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires,
Pabellón I, Ciudad Universitaria, 1428 Buenos Aires, Argentina.*

(Dated: June 11, 2019)

Se estudio la evolución de un sistema de Ising de dos dimensiones para distintos tamaños de red y temperaturas. Se buscaron los exponentes críticos de la transición de fase que sufre la magnetización media de la muestra en función de la temperatura, llegando a los valores esperados por la teoría, siendo estos,

$$\begin{cases} \gamma = (1.70 \pm 0.10) \\ \beta = (0.108 \pm 0.002) \\ \alpha = (-0.002 \pm 0.002) \end{cases}$$

I. INTRODUCCIÓN

El modelo de Ising es un modelo físico desarrollado para estudiar el comportamiento de materiales ferromagnéticos, pero que es de interés para el estudio de fenómenos críticos en general. Es el modelo paradigmático para el estudio de transiciones de fase, presentando una de ellas cuando la temperatura del sistema decrece a un valor crítico tal que surge magnetización espontánea.

Este modelo fue inventado por el físico Wilhelm Lenz, que lo concibió como un problema para su alumno Ernst Ising para demostrar que el sistema presentaba una transición de fase. Ising demostró que en una dimensión no existía tal transición de fase, resolviéndolo en su tesis de 1924. El modelo bidimensional de Ising de retícula cuadrada solo pudo ser descripto analíticamente mucho más tarde, por Lars Onsager, que demostró que efectivamente se encuentra una transición de fase a una temperatura crítica $T_c > 0$ [1].

II. EL MODELO

El modelo de Ising se constituye por un arreglo bidimensional de espines estáticos con orientación *up* o *down*, los cuales evolucionan de manera "aleatoria" en función de la temperatura de la muestra y la energía de interacción entre espines. Esta evolución esta caracterizada por un Metropolis - Hastings, el cual será explicado en la proxima sección.

A. Algoritmo de Metropolis Hastings

El algoritmo de Metropolis Hastings, tambien conocido como Markov-Chain Monte Carlo (MCMC) es un metodo para obtener secuencias de muestras aleatorias de una distribución de probabilidad de la cual sampleo directo es difícil.

Este consiste en tomar muestras de una distribución de la siguiente manera. Se propone un nuevo estado, x' el cual tiene una probabilidad $P(x')$, y se define el siguiente

elemento de la cadena como:

$$x_{i+1} = \begin{cases} x' \text{ si } \frac{P(x')}{P(x_i)} > 1 \\ \left\{ \begin{array}{l} x' \text{ con probabilidad } \frac{P(x')}{P(x_i)} \\ x_i \text{ con probabilidad } 1 - \frac{P(x')}{P(x_i)} \end{array} \right\} \text{ si } \frac{P(x')}{P(x_i)} < 1 \end{cases}$$

Usando este algoritmo, empezando de alguna muestra x_0 , y luego de un periodo de termalización, se llega a una tira de muestras cuya distribución de probabilidad corresponde con la de sampleo. Se entiende termalización como la cantidad de pasos necesarios para que el sistema "olvide" su estado inicial, y así el sampleo sea representativo de la función de probabilidad que la caracteriza.

B. Modelo de Ising

El modelo de Ising estudiado consiste en una red bidimensional infinita, rellena de espines con proyección *up* o *down*, caracterizada por el siguiente Hamiltoniano.

$$H = - \sum_i^N s_i B - J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j, \quad (1)$$

siendo, s_i la proyección de cada espín, B un campo magnético externo, J la energía de interacción entre cada par de espín y $\langle i,j \rangle$ simboliza la sumatoria que cuenta únicamente los primeros vecinos de cada espín. Vemos que no contamos con una energá cinética, por lo que cada espín se encuentra estático.

Existen soluciones analíticas para este problema. Para el caso de $J = 0, B \neq 0$ tenemos que el problema se puede resolver plantenado un sistema canónico, en el cual cada espín no interactua por lo que se puede plantear lo siguiente.

Así, tenemos que la función de partición canónica es

$$Q = \sum \exp^{-\beta H} = \sum_{s_1} \sum_{s_2} \dots \sum_{s_N} \exp^{\beta B \sum_{i=1}^N s_i} \quad (2)$$

$$Q = \left(\sum_{s_1} \exp^{\beta B s_1} \right)^N = (\exp^{B\beta} + \exp^{-B\beta})^N, \quad (3)$$

y por lo tanto la energía del sistema es

$$E = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Q = -\frac{N}{kT} \tanh \frac{B}{kT}. \quad (4)$$

Otro caso muy interesante es el caso de $B = 0, J \neq 0$. Para este caso, Onsager[1] demuestra que existe $T_c =$ tal que para $T < T_c$ se tiene que ocurre magnetización espontánea, que corresponde a una transición de fase de segundo orden (continua, con derivada discontinua) cuyo parámetro de orden es la magnetización media de la red. Tenemos que esta solución dice que la magnetización media de la red en función de J es

$$\langle s_i \rangle = \begin{cases} 0 & \text{si } J^* < J_C \\ [1 - \sinh^{-4}(2J^*)]^{\frac{1}{8}} & \text{si } J^* > J_C \end{cases}, \quad (5)$$

con $J^* = \frac{J}{kT} = J\beta$. Sobre este trabajo se utiliza la siguiente convención, en la cual se toma $k_b = 1$, $J \rightarrow \frac{J}{T}$ y $B \rightarrow \frac{B}{T}$, de manera que $J^* \equiv J$. Tenemos que J_C es tal que:

$$2 \tanh(2J_C) = 1 \Rightarrow J_C \simeq 0.44 \quad (6)$$

III. SIMULACIONES NUMÉRICAS

Para realizar simulaciones numéricas cuya validez se sostenga, se tuvo especial cuidado con las siguientes cuestiones.

Se comenzó por realizar un estudio sobre longitud de correlación y termalización de la red en función de los distintos valores de temperatura, en pos de asegurar que las muestras tomadas sean representativas de la temperatura en la cual se setea el sistema. Para esto se realizó un barrido para $J \in [0.1, 0.6]$, en una red de lado $L = 32$ con 300.000 pasos, con $300.000 \gg L^2 = 1024$, con la intención de estar completamente seguro de que para cada J se llega a un estado representativo de la temperatura y que no corresponde a un transitorio, sino al estacionario. Sobre la figura 1 se puede ver la magnetización media de la muestra en función de cada paso, para $J < J_c$ y $J > J_c$. Vemos que para temperaturas bajas ($J > J_c$) tenemos que la cantidad de pasos para termalizar el sistema se vuelve muy grande superando ampliamente el estimado inicial de L^2 , mientras que para $J < J_c$ el sistema llega a un estado representativo de la temperatura en relativamente pocos casos.

Otro fenómeno interesante surge al estudiar la correlación de las mediciones. Vemos en la figura 2 que para $J \simeq J_c$, la muestra muestra una gran correlación para varios pasos, ya que se puede ver una especie de "forma funcional" para puntos separados por muchos mas de L^2

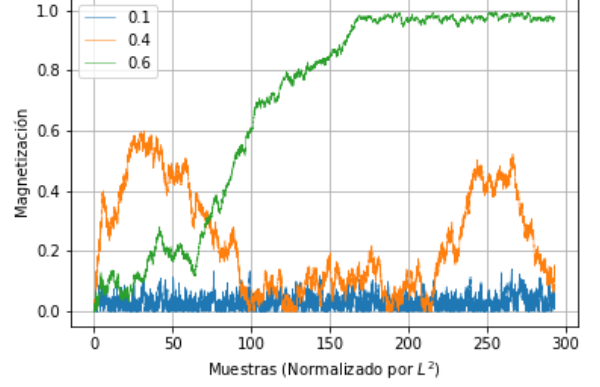


FIG. 1. Magnetización media de la muestra en función del número de pasos, normalizado por L^2 . Vemos que para temperaturas bajas ($J = 0.6$) el número de pasos necesarios para termalizar es muy alto (del orden de 100 veces L^2) mientras que para temperaturas altas ($J = 0.1$) el sistema termaliza en relativamente pocos pasos. Tenemos el caso de $J = 0.4 \simeq J_C$ en el cual se puede ver que la muestra está altamente correlacionada y que no llega a un estado realmente estacionario.

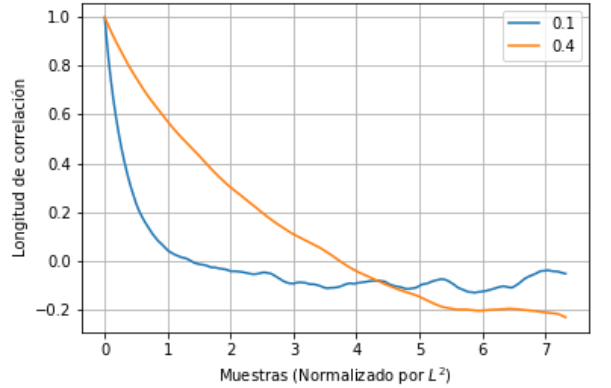


FIG. 2. Longitud de correlación de las muestras de magnetización en función del número de pasos, normalizado por L^2 . Vemos que para temperaturas altas ($J = 0.1$) el número de pasos para descorrelacionar las mediciones es del orden de L^2 , mientras que para $J \simeq J_C$ se vuelve casi 5 veces mayor.

pasos, comparado con el caso de $J < J_c$. Comparando las longitudes de correlación (figura 2) se vuelve muy claro como para J_c es importante que el sampleo de magnitudes ocurra cada una gran cantidad de pasos, en pos de asegurar descorrelación entre mediciones.

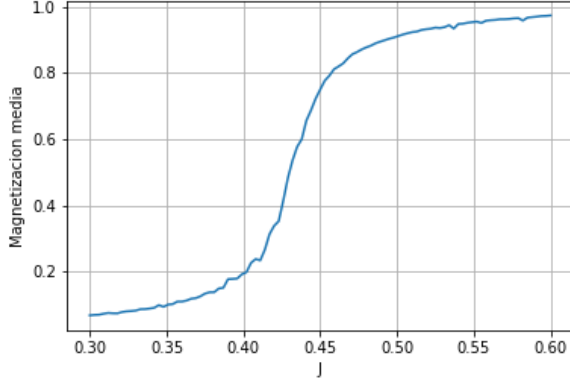


FIG. 3. Magnetización media de la muestra en función de J . Vemos como para temperaturas bajas ($J > J_C \simeq 0.44$) se pierde la suavidad, debido a que la muestra se vuelve muy difícil de termalizar.

IV. RESULTADOS

A. Exponentes críticos

Comenzamos por analizar la red para $B = 0$ y $J \in [0.1, 0.6]$, con un paso de 0.01 y 100.000 puntos por paso. A todas las mediciones se les dio 150.000 pasos para termalizar, y se dejaron 3.000 entre mediciones en pos de asegurar la descorrelación entre mediciones.

El valor medio del absoluto de la magnetización en función de J se puede encontrar en la figura 3. Vemos que efectivamente se puede ver que para $J < J_c \simeq 0.44$ se encuentra que la muestra sufre una ruptura espontánea de simetría, y la muestra empieza a tener una magnetización media total distinta de cero aunque no exista campo magnético. Tenemos que de esta distribución se puede obtener el exponente crítico β , ya que sabemos que

$$\frac{\langle M \rangle}{N} \propto (1 - \frac{T}{T_C})^{\frac{1}{8}} \Rightarrow \beta_{TEO} = \frac{1}{8}.$$

Sobre la figura 4 se puede ver un ajuste logarítmico sobre la parte de la curva correspondiente, llegamos a que $\beta = (0.108 \pm 0.002)$, un poco por debajo del valor teórico de $\frac{1}{8} = 0.125$.

Más interesante de estudiar son las funciones respuesta del sistema, siendo particularmente interesante en este caso la susceptibilidad magnética $\chi = \frac{\partial M}{\partial B}|_{B \rightarrow 0} \simeq \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2$.

En la figura 5 tenemos la susceptibilidad magnética en función de J . Vemos como tenemos un pico en la zona de $J \simeq J_C$, cuyo valor si la red fuera infinita diverge. Sabemos que la susceptibilidad magnética sigue una ley de potencias, siendo esta cerca del punto crítico proporcional a $|T - T_c|^{-\gamma}$, con el valor teórico de γ siendo $\gamma_{TEO} = \frac{7}{4}$.

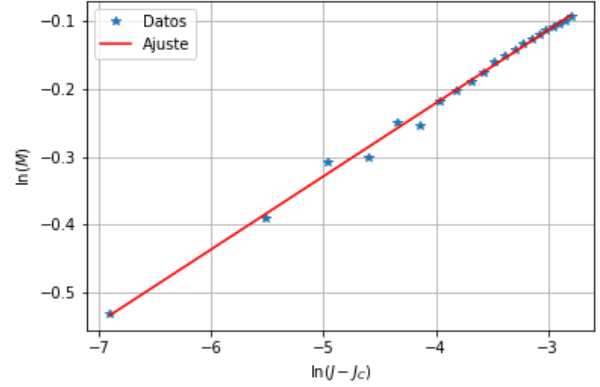


FIG. 4. Ajuste lineal del logaritmo de la magnetización media de la muestra en función de $J - J_c$, con $J_C = 0.44$ el valor teórico. Tenemos que el ajuste da un valor de $\beta = (0.108 \pm 0.002)$, un poco por debajo del valor teórico de $\frac{1}{8} = 0.125$.

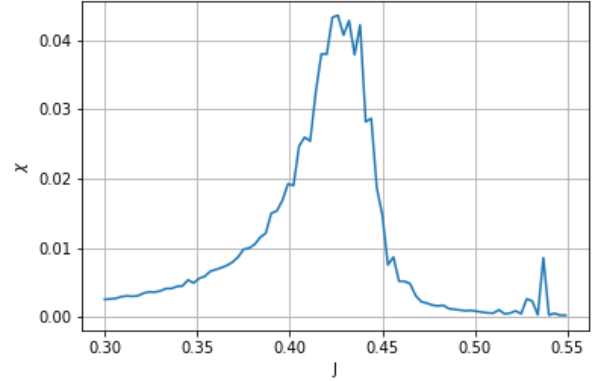


FIG. 5. Susceptibilidad magnética en función de J . Vemos como tenemos un pico asimétrico en $J \simeq 0.44$, correspondiente a la transición de fase.

En la figura 6 tenemos un ajuste lineal sobre la curva de la susceptibilidad magnética en función de J , llegando a un valor de $\gamma = (1.70 \pm 0.10)$ y $J_C = (0.421 \pm 0.001)$. Vemos que el γ encontrado es indistinguible del valor teórico. Además, tenemos que el J_C es mas chico que el teórico, lo que es esperado debido a los efectos de red finita.

La solución exacta de Onsager nos indica que $C \propto \ln(1 - \frac{T}{T_C})$, lo que implica que no existe ley de potencia para C . Podemos ver la capacidad calorífica de la red en función de J en la figura 7. Si uno quiere forzar la existencia de una ley de potencias y realiza un ajuste, encuentra efectivamente que $\alpha = (-0.002 \pm 0.002)$, como se puede ver en la figura 8.

De esta manera, tengo que se cumple que:

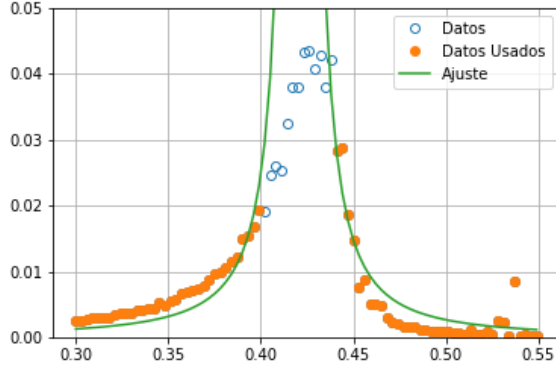


FIG. 6. Ajuste no lineal de la susceptibilidad magnética en función de J . Tenemos que el ajuste corresponde a $\gamma = (1.70 \pm 0.10)$, valor indistinguible del valor teórico $\gamma_{TEO} = \frac{7}{4}$ y $J_C = (0.421 \pm 0.001)$, menor al teórico, a causa de los efectos de red finita.

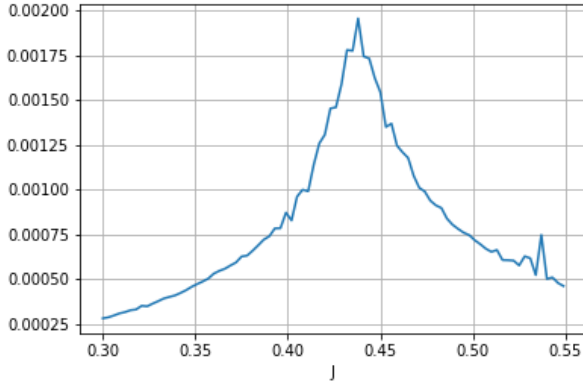


FIG. 7. Capacidad calorífica de la red en función de J .

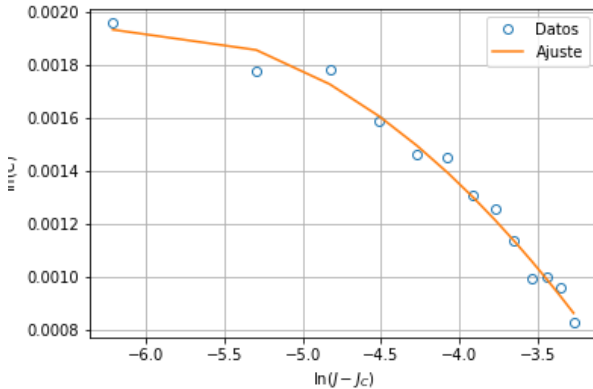


FIG. 8. Ajuste sobre el logaritmo de la capacidad calorífica, en función del logaritmo de la diferencia entre J y J_C . El ajuste se realiza permitiendo una dependencia cuadrática, se encuentra entonces que $\alpha = (-0.002 \pm 0.002)$, compatible con 0 como lo indica la teoría.

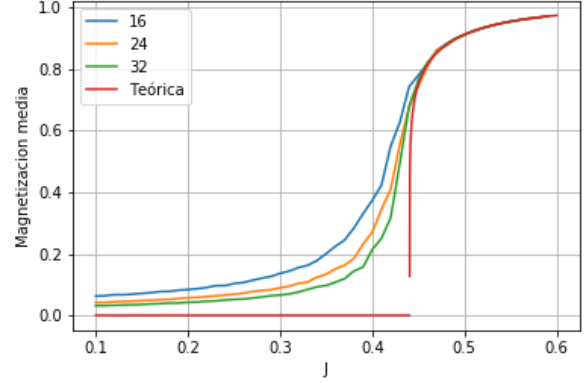


FIG. 9. Magnetización media de la red en función de J para distintos valores de L , además de la curva teórica. Se puede ver claramente como la finitud de la red incide sobre la suavidad sobre la transición.

$$\begin{cases} \gamma = (1.70 \pm 0.10) \\ \beta = (0.108 \pm 0.002) \\ \alpha = (-0.002 \pm 0.002) \end{cases},$$

por lo que puedo conseguir el exponente ν usando la relación universal $\nu d = 2 - \alpha$, llegando a que $\nu = 1$.

B. Efectos de red finita

Existen consecuencias por simular un sistema infinito como uno finito pero periódico. Estas consecuencias se conocen como efecto de red finita, y en este caso son predominantemente 2.

Uno de los efectos de red finita es la suavización de las curvas de magnetización en función de J . En la figura 9 se puede ver este fenómeno.

Otro efecto de red finita que se puede ver es la disminución de J_C en función de L , se tiene que para L finito se "adelanta" la transición. Esto se hace especialmente claro en el gráfico de la susceptibilidad magnética, como se puede ver en la figura 10. Se puede ver como las curvas son trasladadas hacia la derecha a medida que crece L .

V. CONCLUSIONES

Se realizó un estudio sobre una red bidimensional cuadrada de Ising, en el rango de $\frac{J}{kT} \in [0.1, 0.6]$, para lados de $L \in 4, 16, 24, 32, 64$. Se observó la transición de fase de primer orden sobre la magnetización de la muestra, siendo el parámetro de orden la temperatura de la muestra, cuyos exponentes críticos medidos fueron

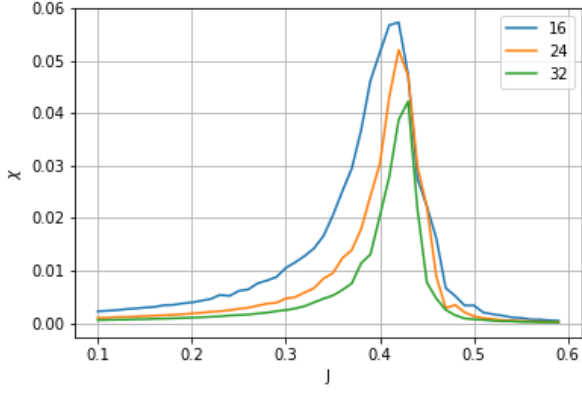


FIG. 10. Susceptibilidad magnética de la red en función de J para distintos valores de L . Se puede ver claramente como la finitud de la red incide sobre las curvas, desplazándolas hacia menores J .

$$\begin{cases} \gamma = (1.70 \pm 0.10) \\ \beta = (0.108 \pm 0.002) \\ \alpha = (-0.002 \pm 0.002) \end{cases},$$

todos indistinguibles con los predichos teóricamente excepto por β , el cual difiere en un 10%.

Se estudiaron también los efectos de red finita, pudiendo identificar como la finitud de la red tiene como principales efectos suavizar y adelantar las transiciones.

[1] L. Onsager, Phys. Rev. **65**, 117 (1944).